

Numerical analysis for nonlinear diffusion problems

九州大学大学院数理学研究院 村川 秀樹

Hideki Murakawa

Faculty of Mathematics,

Kyushu University

1 はじめに

本稿では、次の非線形拡散問題を取り扱う。

$$\begin{cases} \frac{\partial z}{\partial t} = \Delta \beta(z) + f(z) & \text{in } Q := \Omega \times (0, T), \\ \beta(z) = 0 & \text{on } \partial\Omega \times (0, T), \\ z(\cdot, 0) = z^0 & \text{in } \Omega. \end{cases} \quad (1)$$

ここで、 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d \in \mathbb{N}$) は境界 $\partial\Omega$ が滑らかな有界領域であり、 T は正定数である。未知関数 z はベクトル値関数 $z = (z_1, \dots, z_M) : \bar{\Omega} \times [0, T) \rightarrow \mathbb{R}^M$ ($M \in \mathbb{N}$) であり、与えられた関数 $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_M)$, $f = (f_1, \dots, f_M) : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^M$, $z^0 = (z_1^0, \dots, z_M^0) \in L^2(\Omega)^M$ もベクトル値である。したがって、考える問題は一般に方程式系である。

関数 β の i 番目の成分の j 番目の変数に関する偏導関数を $(\beta_i)_j$ と書くことにする。ある i に対して、 $(\beta_i)_i(s) = 0$ となる点 s が存在するとき、(1) は退化放物型方程式系と呼ばれる。氷の融解・水の凝固を記述する Stefan 問題や、地下水の流れ問題や細胞生物学における問題などに現れる多孔質媒体流方程式が、退化放物型方程式 ($M = 1$) の典型的な例である。一般に、問題 (1) では、 $\beta_i(z)$ は i 成分 z_i のみではなく、 j 成分 z_j ($j \neq i$) にも依存している。このような拡散を含む問題を交差拡散系という。この種の問題も多くの分野に現れ、数理生態学における重定-川崎-寺本交差拡散系 [9] がその典型例として挙げられる。

本稿では、問題 (1) に対する既存の数値解法を紹介すると共に、効率的に数値解を求められる数値解法を提案する。提案する数値解法には多くの利点がある。線形形であること、実装が容易であること、無条件安定であること、計算コストが低いこと、連立方程式が対称であること、精度が良く研究されている非線形解法のものと同様であることなどである。本稿の数値実験では、Stefan 問題に焦点を絞り、提案数値解法の問題点や今後の課題についても述べたい。

次節では、問題 (1) に対する既存の主な数値解法を紹介する。第 3 節では、効率的な線形解法を提案し、その線形解法についての解析的な結果について簡潔に記述する。第 4 節では、数値実験を行い、その効率性を確かめる。また、問題点や今後の課題について言及する。

2 既存の数値解法

空間離散化をしていない時間離散スキームについて議論する。これらは空間離散もした全離散スキームに比べて、議論上簡素であり、数値解法を構成するにあたり重要な部

分を担うものである．時間刻み幅を $\tau = T/N_T$ ($N_T \in \mathbb{N}$) とし， \mathbf{Z}^0 ， \mathbf{Z}^n ($n = 1, \dots, N_T$) をそれぞれ初期値 \mathbf{z}^0 及び時刻 $t = \tau n$ における解 $\mathbf{z}(\cdot, \tau n)$ の近似を表すものとする．方程式，つまり $M = 1$ の場合を扱う際には，太文字は使わずに，成分を表すための下付き文字も省略する．方程式 (1) については，多くの数値解法が提案され解析されている．特に，次の非線形スキームは多くの研究者により研究されている．

$$\begin{cases} \frac{\beta_\varepsilon^{-1}(U^n) - \beta_\varepsilon^{-1}(U^{n-1})}{\tau} = \Delta U^n + f(\beta_\varepsilon^{-1}(U^n)) & \text{in } \Omega, \\ U^n = 0 & \text{on } \partial\Omega, \\ \mathbf{Z}^n := \beta_\varepsilon^{-1}(U^n) & \text{in } \Omega. \end{cases} \quad (2)$$

ここで，補助的関数 U^n は $\beta(z(\cdot, \tau n))$ の近似を表し， β_ε は，一般に滑らかでなく狭義単調増加でない関数 β を近似する滑らかな強単調増加関数である．実際の数値計算では，(2) のタイプの非線形解法は良い精度を示す．ただし，空間離散化を施したときに現れる連立方程式は非線形であり，線形化のためにニュートン法のような反復解法を用いる必要がある．そのために，実装が幾分面倒になり，計算時間が長くなる．因みに，退化放物型方程式に対して，下に述べる (4) のタイプの非線形解法も扱われることがある．しかしながら，(2) に現れる連立方程式が対称であるのに対し，(4) に現れる連立方程式は非対称であるために，特に空間 2 次元以上の場合には，(2) のタイプの解法の方が (4) に比べてより便利である．なお，連立 1 次方程式が対称である場合には，その解法として ICCG 法などの数学的にも保証されている高速な解法を選ぶことができるが，一方，連立 1 次方程式が対称でない場合は，GMRES 法や BiCGStab 法などが用いられる．

Berger, Brezis, Rogers [2] は退化放物型方程式に対して，次の線形解法を提案した．

$$\begin{cases} \mu U^n - \tau \Delta U^n = \mu \beta(\mathbf{Z}^{n-1}) + \tau f(\mathbf{Z}^{n-1}) & \text{in } \Omega, \\ U^n = 0 & \text{on } \partial\Omega, \\ \mathbf{Z}^n := \mathbf{Z}^{n-1} + \mu(U^n - \beta(\mathbf{Z}^{n-1})) & \text{in } \Omega. \end{cases} \quad (3)$$

ここで， μ は安定化のための正定数である．このスキームは，線形楕円型方程式を解き U^n を求め， \mathbf{Z}^n を陽的に更新するという，非常にシンプルなスキームである．これを空間離散化すると，実装が容易な数値解法を得る．計算の大部分は線形楕円型方程式に当てられる．したがって，実装の容易さや計算時間は線形熱方程式に対する陰解法のそれとほとんど同等である．しかしながら，上記の非線形解法に比べて精度が良くないという欠点がある．それは，非線形拡散を拡散係数が定数の線形拡散で近似していることに由来する．

交差拡散系に対する数値解析の歴史は浅く，文献の数も多くない．多くの研究者は次のタイプの非線形陰解法を扱っている．

$$\begin{cases} \frac{\mathbf{Z}^n - \mathbf{Z}^{n-1}}{\tau} = \Delta \beta(\mathbf{Z}^n) + \mathbf{f}(\mathbf{Z}^n) & \text{in } \Omega, \\ \beta(\mathbf{Z}^n) = \mathbf{0} & \text{on } \partial\Omega. \end{cases} \quad (4)$$

図 1 (a) に見られるように，空間離散化によって得られる行列のサイズは，空間 1 次元の場合であっても，大きい疎行列であり非対称である．空間 1 次元の場合であっても，実装が面倒になり，計算コストが高くなることが容易に想像できる．空間多次元や複数成分の問題になると，その欠点はより大きくなる．

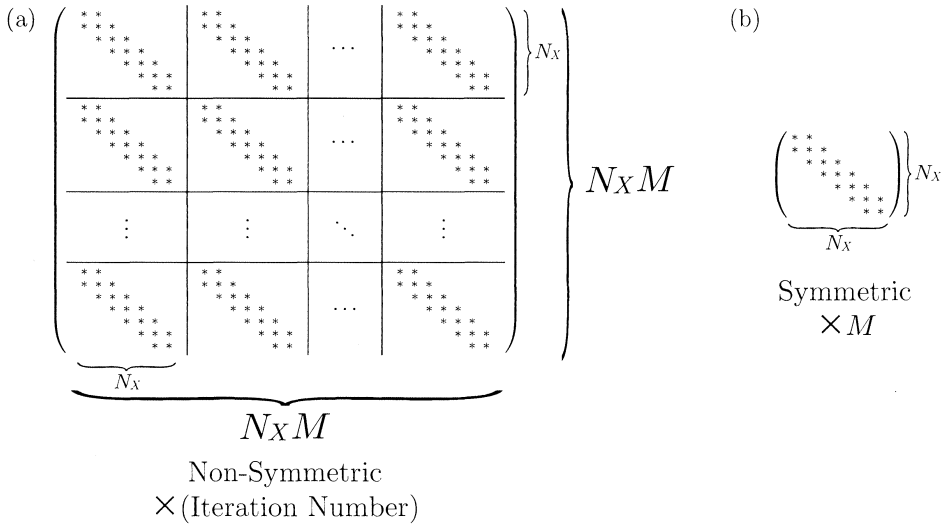


Figure 1: (a) 空間 1 次元の場合に、非線形解法 (4) に現れる行列のタイプ. (b) 空間 1 次元の場合に、線形解法 (5), (6) に現れる行列のタイプ. ここで、 N_X と M はそれぞれ空間メッシュの数と (1) の成分の数を表す.

筆者は、交差拡散系 (1) に対して、次の線形解法を提案した [5, 6, 7].

$$\begin{cases} \mu U^n - \tau \Delta U^n = \mu \beta(Z^{n-1}) + \tau f(Z^{n-1}) & \text{in } \Omega, \\ U^n = 0 & \text{on } \partial\Omega, \\ Z^n := Z^{n-1} + \mu(U^n - \beta(Z^{n-1})) & \text{in } \Omega. \end{cases} \quad (5)$$

このスキームは方程式に対する線形スキーム (3) の系への拡張とみなされる. このスキームは、 M 個の独立した線形楕円型方程式を解き、 U^n を求め、 Z^n を陽的に更新するという単純なものである. 境界条件の取り扱いも非線形スキーム (4) のものに比べて、非常に簡単になっていることに注意されたい. 系になっても、実装の容易さは、線形熱方程式に対する陰解法のためのそれとほとんど変わりはない. 計算すべき行列の型は図 1 (b) に見られる通りである. 行列は時間ステップ及び成分 $i \in \{1, \dots, M\}$ に依存せず一定であるため、計算コストは、熱方程式にかかるその M 倍よりも少ない. 計算精度は非線形解法に比べて劣るかもしれないが、時間 1 ステップに掛かる計算時間は大幅に削減できるため、線形解法の利点は大きいものであろうと考えられる.

3 効率的な線形解法

前節で紹介した非線形解法と線形解法の利点と欠点を考慮して、線形解法 (5) を修正することにより、問題 (1) に対する効率的な線形解法を提案する.

方程式 (1) ($M = 1$) 及び線形解法 (3) を式変形して以下を得る.

$$\begin{cases} \frac{1}{\beta'(z)} \frac{\partial \beta(z)}{\partial t} = \Delta \beta(z) + f(z), \\ \frac{\partial z}{\partial t} = \frac{1}{\beta'(z)} \frac{\partial \beta(z)}{\partial t}, \end{cases} \quad \begin{cases} \mu \frac{U^n - \beta(Z^{n-1})}{\tau} = \Delta U^n + f(Z^{n-1}), \\ \frac{Z^n - Z^{n-1}}{\tau} = \mu \frac{U^n - \beta(Z^{n-1})}{\tau}. \end{cases}$$

U^n が $\beta(z(\tau n))$ の近似であることを注意して、両辺を比較すると、パラメーター μ は形式的に $1/\beta'(z)$ の近似を表しているともみなすことができる。実際の数値計算では、 L_β を β のリップシッツ定数としたときに、 $\mu = L_\beta^{-1}$ と選ぶのが最良である。これは、 $1/\beta'(z)$ の近似として非常に粗いものである。実際に誤差は非線形解法に比べて大きくなる。もし、 μ を $1/\beta'(z)$ の近似として選ぶことができれば、より精度の高い数値解を得ることができるのではないかと期待される。最も単純な選び方は $\mu = 1/\beta'(Z^{n-1})$ であろうと考えられる。実際に、このように選ぶと非線形解法並みに誤差が小さい数値解法を得る。このアイデアを拡張し、定数 μ を時間ステップと空間変数に依存する関数として置き換えた、次の線形スキームを提案する [8]。

$$\begin{cases} \mu_i^n U_i^n - \tau \Delta U_i^n = \mu_i^n \beta_i(Z^{n-1}) + \tau f_i(Z^{n-1}) & \text{in } \Omega, \\ U_i^n = 0 & \text{on } \partial\Omega, \quad (i = 1, \dots, M). \\ Z_i^n = Z_i^{n-1} + \mu_i^n (U_i^n - \beta_i(Z^{n-1})) & \text{in } \Omega \end{cases} \quad (6)$$

ここで、 $\mu_i^n = \mu_i^n(x)$ ($i = 1, \dots, M$) は与えられた関数である。このちょっとした変更がスキームをより高精度なものとする。実装の容易さや計算コストは (3) 及び (5) のものときほど変わらない。線形スキーム (6) から生成される行列の形は線形熱方程式に対する陰解法から生成される行列の形と同じ形である (図 1 (b))。ただし、対角成分は定数ではない。行列は対称であり、ICCG 法などの高速な解法を採用することができる。一方で、前述したように、非線形スキーム (4) から得られる行列 (図 1 (a)) は、空間 1 次元の場合であっても、サイズが大きく、非対称な疎行列である。計算コストの差は歴然であろう。

線形スキーム (6) の時間ステップサイズ τ に関する収束の速さは解析的に得られている [8]。退化拡散と交差拡散の取り扱い、解析的に異なる面があるため、一般的な退化交差拡散系を取り扱うことは難しい。したがって、それぞれの場合を分けて考える。解析的結果をまとめると以下の通りである。ただし、弱解の定義や仮定の詳細については、紙面の都合上省略する ([8] を参照)。

系 (1) の弱解を \mathbf{z} とし、 \mathbf{U} , \mathbf{Z} を (6) の弱解の時間方向に区分的定数補完した関数とする。誤差 E を次のように定義する。

$$\begin{aligned} E := & \|\beta(\mathbf{z}) - \mathbf{U}\|_{L^2(Q)^M} + \left\| \int_0^t (\beta(\mathbf{z}) - \mathbf{U}) \right\|_{L^\infty(0,T;H^1(\Omega))^M} \\ & + \|\mathbf{z} - \mathbf{Z}\|_{L^\infty(0,T;H^{-1}(\Omega))^M}. \end{aligned}$$

このとき、ある仮定の下で、次のオーダーが得られる。

- 退化放物型方程式系について (非交差拡散),

$$\mathbf{z}^0 \in L^2(\Omega)^M \implies E = O(\tau^{1/4}), \quad (7)$$

$$\mathbf{z}^0 \in L^\infty(\Omega)^M, \Delta \beta(\mathbf{z}^0) \in L^1(\Omega)^M \implies E = O(\tau^{1/2}). \quad (8)$$

- 交差拡散系について（非退化）

$$z^0 \in L^2(\Omega)^M \implies E + \|z - Z\|_{L^2(Q)^M} = O(\tau^{1/2}), \quad (9)$$

$$z^0 \in H_0^1(\Omega)^M \implies E + \|z - Z\|_{L^2(Q)^M} = O(\tau). \quad (10)$$

これらの内の評価 (8)–(10) は解の正則性から最適な評価であることがわかる。実際に，退化放物型方程式の解 z は次の性質を持つ。 $\beta(z) \in H^1(0, T; H^{-1}(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^1(\Omega)) \subset H^{1/2}(0, T; L^2(\Omega))^M$, $\int_0^t \beta(z) \in H^1(0, T; H^1(\Omega)) \subset C^{0,1/2}([0, T]; H^1(\Omega))$, $z \in H^1(0, T; H^{-1}(\Omega)) \subset C^{0,1/2}([0, T]; H^{-1}(\Omega))$. これらの正則性は (8) が最適な評価であることを示す。拡散が非退化型の場合は， $z \in H^{1/2}(0, T; L^2(\Omega))^M$ が成り立ち，これは (9) が最適な評価であることを表している。非退化交差拡散系の場合に，初期値が $z^0 \in H_0^1(\Omega)^M$ を満たすときは，解はより滑らかになり， $z \in H^1(0, T; L^2(\Omega))^M$, $\beta(z) \in H^{1/2}(0, T; H^1(\Omega))^M$ (see [6]) を満たす。これらのことは，(10) が最適な評価であることを示している。

これらの誤差評価 (7)–(10) は， μ が定数の場合でも同じである。このことは，退化放物型方程式に対して Magenes, Nocketto, Verdi [3] によって得られ，交差拡散系に対しては筆者 [6] によって得られている。ただし， $\mu_i^n(x)$ を適切に選べば，実際の数値計算誤差は μ が定数の場合に比べて著しく小さくなる。

4 数値実験

本節では，提案解法の有用性を示すため，また，問題点を指摘するために，Stefan 問題に対する 1 次元の数値実験を行う。多孔質媒体流方程式や交差拡散系，非線形移流反応拡散方程式に対する数値実験については，[4, 8] を参照されたい。非線形スキーム，線形スキームのいずれも扱うが，空間離散化として一様メッシュの差分法を用いる。全ての数値計算は CPU として Intel Core(TM) i7-3667U を備えたラップトップで，C 言語を用いて実装し，コンパイラーは GCC，オプション-O3，1 スレッドを用いて行う。

次の離散 $L^2(Q)^M$ 相対誤差 $E_{\beta(z)}$ を計算する。

$$E_{\beta(z)} = \left(\frac{\sum_{\substack{0 \leq j \leq N_X \\ 1 \leq n \leq N_T}} |U^{j,n} - \beta(z(x_j, n\tau))|^2}{\sum_{\substack{0 \leq j \leq N_X \\ 1 \leq n \leq N_T}} |\beta(z(x_j, n\tau))|^2} \right)^{1/2}.$$

ここで， $N_X + 1$ は空間メッシュ数， x_j ($0 \leq j \leq N_X$) は格子点を表す。

古典的 2 相 Stefan 問題

氷の融解・水の凝固を記述する典型的なモデルである，古典的 2 相 Stefan 問題を扱う。次の初期値境界値問題を考えよう。

$$\begin{cases} \frac{\partial z}{\partial t} = \Delta \beta(z) & \text{in } \cup_{t>0} \Omega \times \{t\}, \\ \beta(z(0, t)) = k_1 \theta^* & \text{for } t > 0, \\ \frac{\partial \beta(z(x, t))}{\partial x} = 0 & \text{as } x \rightarrow \infty, t > 0, \\ z(x, 0) = C_2 \theta_0 & \text{for } x > 0. \end{cases} \quad (11)$$

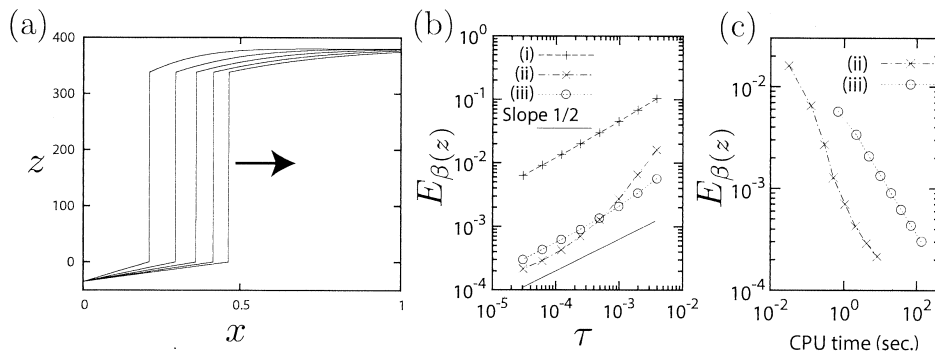


Figure 2: (a) Exact solution of the Stefan problem (11) at time $t = 0.21, 0.41, 0.61, 0.81, 1.01$. (b), (c) Numerical results for the Stefan problem (11) for the time step sizes $\tau = 2^{-8}, 2^{-9}, \dots, 2^{-15}$. The spacial mesh size is fixed as $h = 2^{-12}$. (i) the linear scheme (3), (ii) the linear scheme (6) with (13), (iii) the nonlinear scheme (2).

ここで、 β は $\kappa_i = k_i/C_i$, $\theta^* < 0$, $\theta_0 > 0$ を定数として $\beta(r) = \kappa_2 \max(r - \lambda, 0) + \kappa_1 \min(r, 0)$ と定義される。正定数 k_i , C_i , λ はそれぞれ熱伝導率, 熱容量, 潜熱係数を表す。解 z はエンタルピーを表す。温度は $\theta(\beta(z))$ によって記述される。ここで、 $\theta(r) = \max(r, 0)/k_2 + \min(r, 0)/k_1$ である。この問題は次の解析解をもつ (図 2 (a)).

$$z(x, t) = \begin{cases} C_1 \theta^* \left(1 - \frac{\operatorname{erf}(x/(2\sqrt{\kappa_1 t}))}{\operatorname{erf} \phi} \right) & \text{if } x \leq s(t), \\ C_2 \theta_0 \left(1 - \frac{\operatorname{erfc}(x/(2\sqrt{\kappa_2 t}))}{\operatorname{erfc}(\phi\sqrt{\kappa_1/\kappa_2})} \right) + \lambda & \text{if } x > s(t). \end{cases}$$

ここで、氷の領域と水の領域の境目である界面は $s(t) = 2\phi\sqrt{\kappa_1 t}$ によって表され、 ϕ は次の代数方程式の解である。

$$\frac{e^{-\phi^2}}{\operatorname{erf} \phi} + \frac{k_2}{k_1} \sqrt{\frac{\kappa_1}{\kappa_2}} \frac{\theta_0 e^{-\kappa_1 \phi^2 / \kappa_2}}{\kappa_2 \theta^* \operatorname{erfc}(\phi\sqrt{\kappa_1/\kappa_2})} + \frac{\phi \lambda \sqrt{\pi}}{C_1 \theta^*} = 0.$$

計算領域を $\Omega = (0, L) = (0, 1)$ とし、時間区間 $(0.01, 1.01]$ において計算を実行する。 $x = 1$ においては解析解の値を用いて Dirichlet 境界条件を課す。計算では、次の値を用いる。 $k_1 = 2.22$, $k_2 = 0.556$, $C_1 = 1.762$, $C_2 = 4.226$, $\lambda = 338$, $\theta^* = -20$, $\theta_0 = 10$ 。このとき、 ϕ の近似値は 0.205428 で与えられ、数値計算ではこの値を用いる。

非線形解法について

Stefan 問題において、関数 β の逆関数 β^{-1} は多価関数であるため、それを近似する必要がある。非線形スキーム (2) の中の近似逆関数 β_ε^{-1} を次で定義する。

$$\beta_\varepsilon^{-1}(u) = \begin{cases} \frac{u}{\kappa_1} + \frac{\lambda}{2} \exp\left(\frac{u}{\varepsilon - k_1}\right) & \text{if } u < 0, \\ \lambda + \frac{u}{\kappa_2} - \frac{\lambda}{2} \exp\left(-\frac{u}{\varepsilon + k_2}\right) & \text{if } u \geq 0. \end{cases} \quad (12)$$

ここで、 ε を正のパラメーターとし、 ε^\pm は $\varepsilon^- = \varepsilon(1 + S - \sqrt{1 + S})/(2S)$, $\varepsilon^+ = \varepsilon(S - 1 + \sqrt{1 + S})/(2S)$, $S = (C_2 - C_1)\varepsilon/\lambda$ により与えられる。この非線形スキーム (2) 及び近似逆関数 (12) は Beckett, Mackenzie, Robertson [1] によって用いられたものである。空間離散化を施すと、非線形連立方程式を得る。その非線形連立方程式を線形化するために、ニュートン法を用いる。そうして得られる連立 1 次方程式はガウスの消去法により解く。ニュートン法は許容誤差が 10^{-10} を下回るまで反復する。パラメーター ε を、ニュートン法が収束し、なるべく誤差が小さくなるように適切に選ぶのは一苦勞である。非常に多くの数値実験を行った結果、 $\varepsilon = 5\sqrt{\tau}$ と選ぶことにした。

線形解法について

既存の線形解法 (μ は固定) と提案線形解法 (μ は時間ステップと空間変数に依存) の双方について数値計算を行う。既存の線形解法では、 $\mu = 0.79$ とする。これは、 β のリップシッツ定数の逆数よりほんの少しだけ小さな値である。提案解法では $\mu^n(x)$ をうまく選ぶ必要がある。前述したように、 $1/\beta'(z)$ の近似として選ぶのが良い (実はこのことは解析的にも得られる)。ここでは、次のように選ぶ。

$$\mu^n(x) = 1/(10^{-3} + \beta'(Z^{n-1}(x))). \quad (13)$$

ここで、分母が 0 になっては困るため、分母に 10^{-3} を加えた。非線形解法における ε の選び方はかなりシビアであるが、この 10^{-3} の選び方はシビアではない。

数値結果

空間メッシュは固定し、 $N_X = 2^{12}$ として、時間刻み幅 τ に関する収束の速さについて調べる。図 2 (b) は $\tau = 2^{-8}, 2^{-9}, \dots, 2^{-15}$ に対する数値結果である。どの解法においても、誤差は概ね傾き $1/2$ の直線に沿っている。これは、 τ に関する収束のオーダーが $1/2$ であることを示している。これは、解析的な結果 (8) と一致する。

提案スキーム (6) の誤差は良く研究されている線形スキーム (3) の誤差に比べてかなり小さいことが見て取れる。そして、この数値実験では、それは良く研究されている非線形スキーム (2) の誤差と比べて遜色ない。提案線形スキームと既存の非線形スキームを実際の計算時間の観点から比較したものが図 2 (c) に描かれている。この数値実験では、提案解法は非線形解法のおよそ $1/100$ の計算時間で同程度の精度を達成していることが見て取れる。これらの結果は、提案解法は実装が容易で計算コストが低いにも関わらず、非線形解法よりも高速に十分な精度の数値解を得ることができる解法であることを示唆している。実装が容易である、計算コストが低い、計算時間が短いといった、提案解法の利点は、複数成分や空間多次元問題になった場合により大きなものとなることは想像に難くない。

非線形解法におけるニュートン法の反復回数は時間 1 ステップ辺りおおよそ 3~5 回である。また、空間 1 次元 1 成分の場合には、行列の形は線形解法、非線形解法共に同じである。したがって、本来なら、提案線形解法は非線形解法の 4 倍程度速いということに収まりそうである。実は、この 100 倍という大きな差は数学関数の使用に起因する。C 言語では、数学関数の呼び出しに時間が掛かる。線形解法では β そのもの (区分的 1 次関数) のみを使っているために、数学関数を使用しないが、非線形解法では β の近似において $\exp()$ を使用している。このことが、計算時間の大きな違いを生んでいる。非線形解

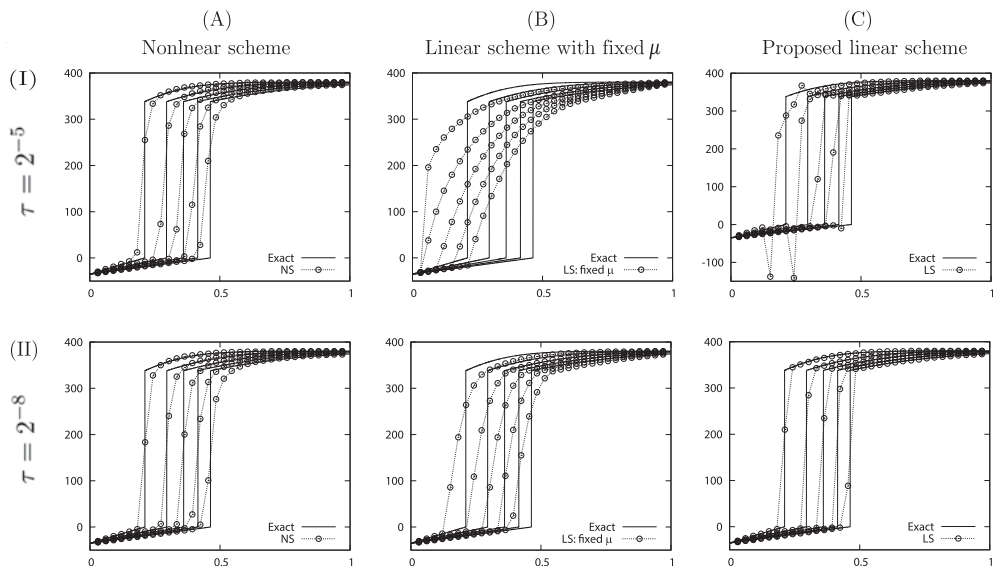


Figure 3: Numerical solutions at time $t = 0.21, 0.41, 0.61, 0.81, 1.01$. The spacial mesh size is fixed as $h = 2^{-5}$. (A) the nonlinear scheme (2), (B) the linear scheme (3), (C) the linear scheme (6) with (13).

法では関数 β を滑らかな関数で近似する必要があることや、その逆関数を計算する必要があるといったことが、面倒であるといったこと以上にデメリットになり得る。

問題点と課題

数値解を詳しく見てみよう．空間メッシュ幅を $h = 1/N_X = 2^{-5}$ と固定し， $\tau = 2^{-5}$ ， $\tau = 2^{-8}$ としたときの数値解を図 3 に示している．非線形解法 (2) で用いる ε は $\varepsilon = 1.9$ として固定した．なお， ε を 1.8 以下にすると $\tau = 2^{-8}$ の場合にニュートン法が収束しなかった．非線形解法 (2) を用いた数値解 (図 3 (A)) は， $\tau = 2^{-5}, 2^{-8}$ のいずれの場合も概ね真の解を近似しているようである．また，数値解は界面付近 (解の不連続面) でなまっているように見える．これは，単調非減少関数 β を強単調増加関数 β_ε で近似したことによる．ニュートン法を用いる場合にはその収束性を確保するためにこの近似が必要である．このときの β_ε や ε を適切に設定するのは非常に大変である．線形解法 (3) による数値解 (図 3 (B)) の精度は良くないように見えるが，安定に計算できているようである．線形解法 (6) による数値解 (図 3 (C)) は，時間刻み幅が $\tau = 2^{-5}$ と小さくない場合にも， μ を固定した場合に比べて L^2 ノルムに関する誤差は改善されているようである．ただし，この場合，界面付近で上下に振れていて不安定に見える．しかし，実際には，計算が破綻することはない．時間刻み幅が $\tau = 2^{-8}$ と十分に小さい場合は，数値解が上下に振れることはなく，真の解を良く近似できていることが見て取れる．空間メッシュサイズが $h = 2^{-12}$ と小さいときの数値解 (図 4) を見ると，その振る舞いがより顕著に見られるかもしれない． $\tau = 2^{-10}$ のときの数値解は，概ね解の形状を捉えているように見えるが，界面の付近で大きく下に振れている． L^2 ノルムでは解を近似できていると思われるが，工学的には L^∞ ノルムでの近似が多くの場合に要請されると思われる．そのような場合には，この振る舞いは欠点となり得る．時間刻み幅を小さくすると，この不具合

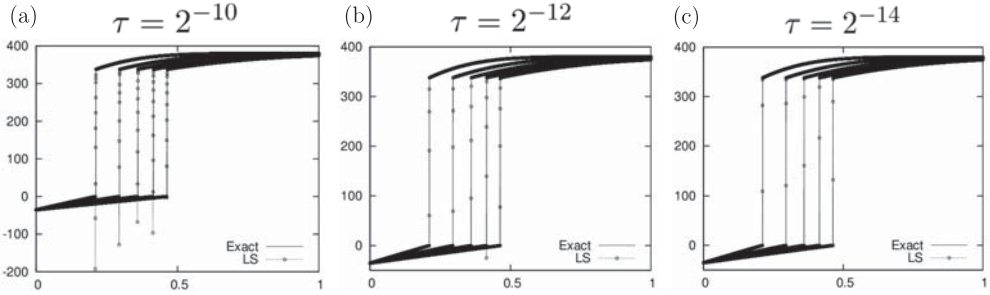


Figure 4: Numerical solutions of the linear scheme (6) with (13) at time $t = 0.21, 0.41, 0.61, 0.81, 1.01$. The spatial mesh size is fixed as $h = 2^{-12}$.

は解消され、解を精度良く近似できているようである。図 2 (b) と見比べてみると、丁度、見かけ上この不具合が解消される時間刻み幅のところで、非線形解法 (2) と線形解法 (6) の計算精度が逆転していることが見て取れる。解析 [7, 8] では、 L^2 ノルムに関する安定性や収束性についての結果が得られている。空間離散化を含めた解析や、 L^∞ ノルムに関する解析を行うことによって、詳細が分かるかもしれないし、スキームの更なる改良ができるかもしれない。式 (13) では、 β' は区分的定数関数 (不連続関数) である。これを、滑らかな関数で近似するというのも一つの手であるかもしれないが、その設定の仕方の煩雑さや数学関数の使用など、非線形解法のデメリットと同様のものが現れるため、有効な方法ではないのではないと思われる。

もう 1 つ現在判明している欠点がある。FreeFem++ を用いて線形スキーム (6) の実装を試みたところ、うまくいかなかった。この件についても、解明と改善に向けて、空間離散化を含めたより詳細な解析が必要である。

5 帰結

Stefan 問題、多孔質媒体流方程式、交差拡散系を含む、非線形問題 (1) に対する数値解法についての文献を調べ上げ、その中でもよく研究されている非線形解法 (2), (4) と線形解法 (5) について考えた。非線形解法は実際の計算では良い精度を示すが、実装やパラメーターの設定が煩雑であり、計算コストが高いという欠点がある。また、線形解法 (5) は、実装が容易で計算コストが低いというメリットがあるが、精度があまり良くないという欠点がある。そこで、それぞれの利点と欠点を踏まえて、線形解法 (5) を改良することにより、線形解法 (6) を提案した。線形解法 (6) は実装が容易で計算コストが低いにも関わらず、非線形解法 (2), (4) と同程度の精度が得られる解法であることが数値実験により確かめられた。ステファン問題や多孔質媒体流方程式に対する数値実験では、非線形解法 (2) の数十倍から 100 倍程度高速に同程度の精度を得ることが確かめられた。これらの利点や欠点、実際の計算時間や誤差を考慮すると、非線形問題 (1) を取り扱う場合には、非線形解法 (2), (4) を採用する理由はない。提案線形解法 (6) の利点と非線形解法 (2) の欠点は、空間多次元や複数成分になるとより大きくなる。

本稿では、数値解を詳しく見ることにより、提案線形解法の欠点も見た。Stefan 問題に対する数値実験では、時間刻み幅が空間メッシュサイズに比べて大きな場合は、界面付近で数値解が大きく振れることが見て取れた。この現象は十分な精度が得られるよう

に時間刻み幅を小さくとると解消されるが、原因を究明したい。FreeFem++での実装がうまくいかないという問題点もあり、空間離散化を含めたより詳細な解析が必要である。

謝辞

本研究は、JSPS KAKENHI Grant nos. 26287025, 15H03635, 17K05368, 及び JST CREST Grant No. JPMJCR14D3 の助成を受けている。

参考文献

- [1] G. Beckett, J. A. Mackenzie and M. L. Robertson, A moving mesh finite element method for the solution of two-dimensional Stefan problems, *J. Comp. Phys.*, 168 (2001), pp. 500–518.
- [2] A.E. BERGER, H. BREZIS AND J.C.W. ROGERS, *A numerical method for solving the problem $u_t - \Delta f(u) = 0$* , R.A.I.R.O. Anal. Numér., 13 (1979), pp. 297–312.
- [3] E. MAGENES, R.H. NOCHETTO AND C. VERDI, *Energy error estimates for a linear scheme to approximate nonlinear parabolic problems*, *Math. Mod. Numer. Anal.*, 21 (1987), pp. 655–678.
- [4] M. Molati and H. Murakawa, *An efficient linear numerical scheme for the Stefan problem, the porous medium equation and nonlinear cross-diffusion systems*, In K. Mikula, D. Sevcovic and J. Urban Eds. *Proceedings of Equadiff 2017 Conference*, (2017), pp. 305–314.
- [5] H. MURAKAWA, *A linear scheme to approximate nonlinear cross-diffusion systems*, *Math. Mod. Numer. Anal.*, 45 (2011), pp. 1141–1161.
- [6] H. MURAKAWA, *Error estimates for discrete-time approximations of nonlinear cross-diffusion systems*, *SIAM J. Numer. Anal.*, 52(2) (2014), pp. 955–974.
- [7] H. MURAKAWA, *A linear finite volume method for nonlinear cross-diffusion systems*, *Numer. Math.*, 136(1) (2017), pp. 1–26.
- [8] H. MURAKAWA, *An efficient linear scheme to approximate nonlinear diffusion problems*, to appear in *Jpn. J. Ind. Appl. Math.*, DOI: 10.1007/s13160-017-0279-3.
- [9] N. SHIGESADA, K. KAWASAKI AND E. TERAMOTO, *Spatial segregation of interacting species*, *J. Theor. Biol.*, 79 (1979), pp. 83–99.